

Настоящая работа посвящена исследованию возможностей недавно предложенной модификации [1], так называемого, Z-метода [2,3] для оценки температуры плавления в рамках КМД. В рамках метода проводится моделирование поведения микроканонического ансамбля с различной энергией. В методе предлагается использовать систему в виде прямоугольного сильно вытянутого в одном из направлений параллелепипеда в периодических граничных условиях. Использование такой геометрии моделируемого образца позволяет получить устойчивое сосуществование жидкости и кристалла. Параметры линии плавления (температура и давление) оцениваются для состояния с сосуществующими фазами. Метод продемонстрировал высокую точность для весьма малого числа частиц (порядка нескольких сотен) в моделируемой системе.

1. Wang S. et al., J. Chem. Phys. 138, 134101 (2013).
2. Belonoshko A. et al., Phys. Rev. B 73, 012201 (2006).
3. Belonoshko A. et al., Phys. Rev. Lett. 100, 135701 (2008).

ВЫЯСНЕНИЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНИМОСТИ МОДЕЛИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ДИОКСИДЕ УРАНА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Коваленко М.А.^{1*}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: akm_max@mail.ru

CLARIFICATION OF THE APPLICABILITY RANGE OF THE POINT DEFECTS MODEL IN URANIUM DIOXIDE BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Kovalenko M.A.^{1*}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The point defects model with the formation of complexes of one cation vacancy and N anion vacancies was considered for uranium dioxide. Formation energies of complexes with $N=0\div 2$ (5.3÷5.8)eV are close to each other. MD simulations were carried out to derive complexes concentrations in a wide range of temperatures. Point defects model was modified for periodic boundary conditions. A comparison with MD results shows that the model is valid only at low temperatures below 1300K.

Теоретические модели, основанные на относительно простых приближениях, такие как термодинамическая модель точечных дефектов (МТД), используются как для обработки экспериментальных данных, так и для прогнозирования свойств объектов при длительных временах эксплуатации или в критических условиях. В случае диоксида урана (и его структурных аналогов) основными

дефектами являются дефекты Шоттки и анти-Френкелевские дефекты в анионной подрешетке, и в мТД широко используется приближение Лидиарда и Матцке (пЛМ) [1]. При этом катионы очень малоподвижны и их диффузия, лимитирующая процессы общего массопереноса типа ползучести и роста трещин, происходит по катионным вакансиям. Ассоциация катионных вакансий с анионными будет влиять на подвижность катионов, и методом молекулярной динамики (МД) можно изучить процессы на микроуровне и сравнить с предсказаниями мТД.

Расчеты проводили при периодических граничных условиях (ПГУ) на системе из 20768 ионов с потенциалами MOX-07 [2]. Поскольку при ПГУ поверхность отсутствует, мы искусственно создавали один дефект Шоттки в виде катионной вакансии в центре и двух анионных вакансий по углам ПГУ ячейки. Для каждой температуры находили концентрации анионных вакансий в сферических слоях вокруг катионной вакансии, и число анионных вакансий по Шоттки N в ближайшем окружении катионной вакансии. Усредняя за время моделирования, можно рассчитать концентрации комплексов “катионная и N анионных вакансий” $[C_N]$. Решение мТД для реальных кристаллов с учетом диссоциации комплексов дает энергии образования комплексов:

$$E(C_0) = E_S - E_{AF}, \quad E(C_1) = E_S - E_{B1} - E_{AF}/2, \quad E(C_2) = E_S - E_{B2} \quad (1)$$

где E_S , E_{AF} – энергии образования дефектов Шоттки и анти-Френкеля, E_{BN} – энергии отрыва N анионных вакансий от комплекса. Подставляя соответствующие значения, можно убедиться, что энергии $E(C_N)$ практически одинаковы ($5.3 \div 5.8$) eV. В пЛМ постулируется, что катионные вакансии изолированные (температура достаточно высока, поэтому существуют только комплексы C_0), и поэтому оно уже некорректно. В МД работе [3] было получено аналогичное решение только для $E(C_1)$.

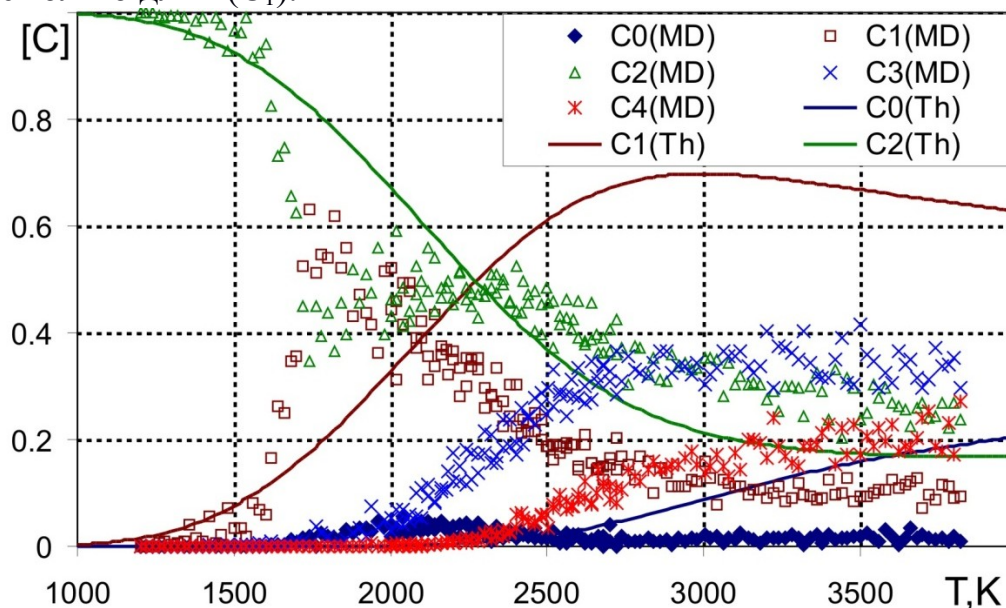


Рис. 1. Температурные зависимости концентраций комплексов C_N (катионная вакансия + N анионных вакансий), полученных методом МД (MD) и в модели точечных дефектов (Th).

МТД легко распространяется на систему при ПГУ, с учетом фиксированной концентрации катионных вакансий. В этом случае невозможно получить простое аналитическое решение типа (1), но можно решить систему уравнений численно и построить концентрацию комплексов C_N . Они, вместе с рассчитанными методом МД концентрациями, приведены на рис.1. Видно, что мТД совпадает с расчетами только при очень низких температурах до 1300 К. До 2000 К мТД только качественно близка к результатам МД, а выше 2000 К в области суперионного перехода полное несовпадение. При этом при высоких температурах существенный вклад дают комплексы с 3 и 4 анионными вакансиями вблизи катионной, что приводит к дальнodelствующему притяжению комплексов C_1 с C_3 и C_4 , а значит ускорению процессов диффузии катионов и их кластерообразованию.

1. HJ. Matzke. J. de Phys. 34 (1973) 317.
2. Поташников С.И. и др. Альтернативная энергетика и экология, №8 (2007) 43.
3. A.S. Boyarchenkov et.al. J. Nucl. Mater. 442 (2013) 148.

СОЗДАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СИСТЕМЫ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ СУПЕРМАРКЕТА

Саврасов Д.В., Соловьева С.Н.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

CREATING A MATHEMATICAL MODEL OF A QUEUING SYSTEM SUPERMARKET

Savrasov D.V., Soloveva S.N.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Today, the Russian retail market, there is a problem to optimize the use of existing resources. This problem is related to the saturation of the market due to the economic trend. One solution to this problem is to use mathematical models to optimize existing resources. This paper describes a mathematical model for the optimization of retail space supermarket.

В настоящее время в сфере розничной торговли актуальной является проблема оптимизации использования существующих ресурсов, вызванная насыщением рынка. Насыщение рынка в сфере розничной торговли происходит по объективным причинам вследствие экономического тренда.

Каждому этапу развития рынка соответствуют описывающие его модели. По мере развития рынка розничной торговли появляются новые критерии, отражающие его функционирование. Существующие в данной области модели с течением времени перестают объективно описывать рынок, следовательно, возникает потребность в создании новых моделей либо обновлении существующих.